

Министерство образования и науки РФ

ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет  
имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УДК 537.6, 537.9

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по науке  
\_\_\_\_\_ Кружаев В.В.  
«\_\_» \_\_\_\_\_ 2013

ОТЧЕТ

О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

В рамках выполнения п.2.1.2.1 Плана реализации мероприятий Программы развития  
УрФУ на 2013 год

ПО ТЕМЕ:  
Микроструктура и термодинамические свойства систем частиц различной формы  
(Заключительный)

Зам. зав.кафедрой	_____ (подпись, дата)	<u>Елфимова Е.А.</u>
Научный руководитель	_____ (подпись, дата)	Канторович С.С.
Исполнитель	_____ (подпись, дата)	Пьянзина Е.С.

Екатеринбург 2013

## Реферат

1. ФИО автора (ов): Пьянзина Елена Сергеевна (Pyanzina Elena Sergeevna)
2. Аннотация: В ходе работы по НИР были проведены исследования систем магнитных эллипсоидов/цилиндров при комнатных температурах. Было показано, что микроструктура системы изменяется от цепочек (образующихся в системе практически изотропных частиц) до практически пространственно-однородной системы (для вытянутых частиц). Было начато исследование основного состояния системы магнитных кубов. Для системы коротких дуплексов ДНК в нематической фазе были получены выражения для вычисления радиальной функции распределения. Было показано, что анизотропия формы, а также энергия взаимодействия дуплексов может способствовать или препятствовать образованию нематической фазы. (During the work on this research project systems of magnetic ellipsoids/cylinder in room temperature conditions have been conducted. It was shown that the microstructure of the system varies from the chains (formed in the substantially isotropic particles) to substantially spatially homogeneous system (for elongated particles). The study of the ground state of the magnetic cubes was undertaken. The expressions for the calculation of the radial distribution function have been done for a system of short DNA duplexes in the nematic phase. It has been shown that the shape anisotropy and the interaction energy of the duplexes can promote or inhibit the formation of the nematic phase.)
3. Ключевые слова: магнитные эллипсоиды/цилиндры, короткие дуплексы ДНК, начальная восприимчивость, радиальная функция распределения, сжимаемость (magnetic ellipsoids/cylinders, short DNA duplexes, initial susceptibility, radial distribution function, compressibility factor)
4. Тема отчета: Микроструктура и термодинамические свойства систем частиц различной формы (Microstructure and thermodynamic properties of systems of particles with different shape).

## Оглавление

Введение.....	4
<b>1 Исследование системы магнитных анизотропных частиц.....</b>	<b>6</b>
Магнитные эллипсоиды/цилиндры .....	6
Магнитные нанокубики .....	13
<b>2 Исследование системы немагнитных анизотропных частиц (короткие дуплексы ДНК) .....</b>	<b>15</b>
Заключение .....	18
Литература .....	20
ПРИЛОЖЕНИЕ 1 .....	21

## Введение

Коллоидные системы, содержащие частицы наноразмеров, представляют собой передовую область исследований, проводимых в физике мягких материалов, поскольку они могут быть использованы для создания новых материалов с управляемыми свойствами. Одним из ярких представителей таких систем являются так называемые магнитные нанодисперсные коллоиды (ферроколлоиды, магнитные коллоиды, феррожидкости, магнитные жидкости), которые являются устойчивыми взвесями частиц из ферро- и ферритмагнитных материалов (окислов железа, никеля, кобальта и других) в жидких магнитнопассивных носителях (керосине, воде, минеральных маслах и других). Впервые такие системы были синтезированы в тридцатых годах прошлого века Элмором. Полученная феррожидкость была очень неустойчивой – частицы имели большой размер, быстро слипались друг с другом и выпадали в осадок. Решение проблемы седиментации и предотвращения необратимой агрегации частиц заняло достаточно много времени. И только в начале шестидесятых годов данные проблемы были решены и опубликованы в статье Ресслера и Розенцвейга. Современные магнитные жидкости обладают высокой агрегативной устойчивостью. Причем речь идет о глобальной, необратимой агломерации, полностью изменяющей макросвойства магнитной жидкости. Но, несмотря на это, микроструктура феррожидкости сложнее, чем микроструктура молекулярной жидкости, и в ней возможно образование различных структур. Несмотря на все особенности синтеза, частицы в таких системах все же являются сферическими. А в последние десятилетия возникли и совершенно новые системы, основанные на частицах различной формы – магнитные наноэллипсоиды, наноцилиндры, кубы, гантели и т.д. Таким образом, к основному парному магнитному диполь-дипольному взаимодействию, добавляется специфическое взаимодействие, зависящее от формы магнитных наночастиц. Также в системе могут присутствовать и другие взаимодействия.

В целом агрегативная устойчивость определяется балансом между притягивающими и отталкивающими межчастичными взаимодействиями. При нарушении этого баланса в феррожидкости возникают различные структуры: капли, рыхлые кластеры, цепочки и т. д. Наиболее типичными для магнитной жидкости со сферическими частицами представляются микроструктуры в виде цепочек из магнитных частиц, магнитные моменты которых практически сонаправлены. Такого рода образования следуют из структуры магнитного диполь-дипольного потенциала (и самого взаимодействия): именно

положение магнитных моментов “голова-хвост” является энергетически наиболее выгодным. Однако при экспериментальных исследованиях систем с магнитными частицами несферической формы были выявлены новые микроструктуры, которые являются наиболее энергетически выгодными и отличаются от цепочек. Это связано с наличием второго энергетического минимума в магнитном диполь-дипольном потенциале. Именно отличие формы частиц от сферической (например, наноэллипсоиды и наноцилиндры) [1,2] являлось причиной этого. Такое поведение хорошо известных систем вызвало большой интерес у исследователей, однако, до сих пор отсутствует теоретическая модель, описывающая системы с магнитными частицами различной формы, не проведен комплексный анализ микроструктуры таких систем, а также отсутствует системное исследование макроскопических свойств в зависимости от формы частиц, их магнитного момента и концентрации.

Другим примером системы с частицами несферической формы служит раствор дуплексов ДНК (коротких фрагментов ДНК) [3,4], в которых происходит самоорганизация частиц. Из-за специфической формы (частицы могут быть представлены как суперквадрики) в данных системах могут образовываться линейные или нитевидные агрегаты, т.е. цепочки. Если агрегаты обладают достаточной жесткостью, в системе может образовываться нематическая фаза. В настоящий момент идет активное изучение таких систем, но, к сожалению, теоретические исследования отстают от экспериментов. Данные системы являются привлекательными при теоретическом изучении в силу научной новизны проблемы, а также по причине того, что автором проекта уже разработана теоретическая модель для системы коротких дуплексов ДНК в изотропной фазе.

Для изучения внутренней структуры систем частиц различной формы можно использовать различные методы: кластерный анализ (выявление основных топологических классов агрегатов, расчет их средних характеристик), реологические, магнитные (для магнитных систем), оптические исследования, компьютерные эксперименты, изучение основного состояния (при 0 К), опыты по малоугловому рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей (SANS и SAXS), из которых можно получить структурный фактор. Данная величина представляет собой Фурье-образ радиальной функции распределения, которая напрямую характеризует межчастичные корреляции в системе. Поэтому, из анализа поведения структурного фактора, можно получить данные о микроструктуре исследуемой системы.

# 1 Исследование системы магнитных анизотропных частиц

В рамках проводимых исследований будут рассматриваться два типа частиц (цилиндры и кубы), приведенные на Рис. 1.



Рис. 1. Магнитные анизотропные частицы

Для магнитных цилиндров (или эллипсоидов) с направлением магнитного момента вдоль оси вращения будут изучены макроскопические параметры, а также проведен кластерный анализ, а для систем из небольшого числа магнитных кубов будет изучено основное состояние.

## Магнитные эллипсоиды/цилиндры

В данном случае, форма частиц считается цилиндрической, с диаметром основания  $a$  и высотой  $b$  (см. Рис. 1а). Магнитный момент таких частиц расположен вдоль основной оси цилиндра. Параметр  $X_0$  (отношение высоты к диаметру основания) определяет анизотропию формы частиц. Взаимодействие между частицами складывается из суммы магнитного и стерического взаимодействия. В уравнении (1), приведенном ниже, представлена магнитная часть взаимодействия:

$$U_{dd}(ij) = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r}_{ij}|^3} \left[ (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j) - 3 \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{|\mathbf{r}_{ij}|^2} \right] \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{r}_{ij}$  обозначает радиус-вектор, соединяющий центры частиц,  $\mu_0$  — магнитная проницаемость вакуума,  $\mathbf{m}$  это постоянный магнитный момент частицы. Ориентация диполя фиксирована внутри частицы. Для обозначения интенсивности магнитного диполь-дипольного взаимодействия будем использовать квадрат безразмерного магнитного момента. Перейдем теперь к стерической части общего потенциала. Его вид представлен в уравнении (2), а положение двух частиц и векторы их ориентации на Рис. 2.

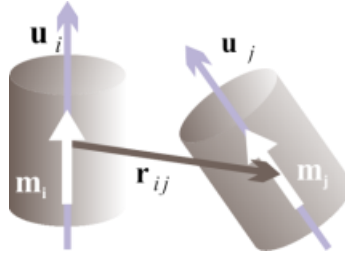


Рис. 2. Расположение двух цилиндров

$$U_{GB}(ij) = \begin{cases} 4\varepsilon(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) \left[ \left( \frac{a}{r_{ij} - \sigma(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j, \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + d} \right)^{12} - \left( \frac{a}{r_{ij} - \sigma(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j, \hat{\mathbf{r}}_{ij}) + d} \right)^6 + \frac{1}{4} \right], & r_{ij} \leq r_c \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases}$$

$$\chi = [X_0^2 - 1] / [X_0^2 + 1] \quad \varepsilon(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j) = \varepsilon_0 (1 - \chi^2 (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j)^2)^{1/2}$$

$$\sigma(\mathbf{u}_i, \mathbf{u}_j, \hat{\mathbf{r}}_{ij}) = d \left[ 1 - \frac{\chi}{2} \left( \frac{(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{u}_i + \hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{u}_j)^2}{1 + \chi \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j} + \frac{(\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{u}_i - \hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{u}_j)^2}{1 - \chi \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j} \right) \right]^{-1/2} \quad (2)$$

Здесь  $\mathbf{u}$  это направляющий вектор частицы, связанный с главной осью, а  $\mathbf{r}_{ij}$  с крышкой обозначает единичный радиус вектор. Данный потенциал является нецентральным и зависит от взаимной ориентации частиц. Впервые был представлен в работе [5] и носит название потенциала Гей-Берне.

Для исследования системы магнитных анизотропных частиц использовались компьютерные эксперименты, поставленные и проведенные автором НИР, а также некоторые теоретические подходы. Первым было изучено поведение радиальной функции распределения (представленной на Рис.3).

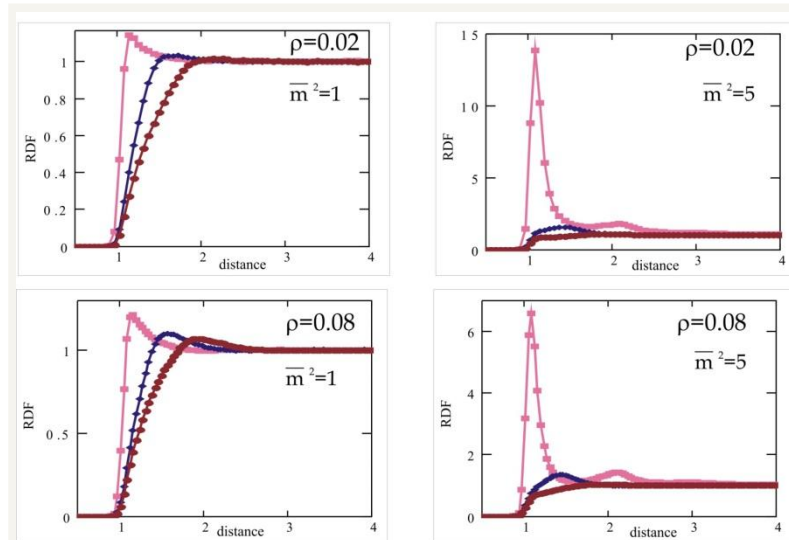


Рис. 3 Радиальная функция распределения как функция расстояния для различных параметров системы.

Разные символы на Рис. 3 соответствуют разным значениям параметра анизотропии (квадраты соответствуют  $X_0=1.1$ , ромбы  $X_0=1.7$ , точки  $X_0=2.3$ ). Видно, что для наименьшего значения  $X_0=1.1$  с увеличением магнитного момента (первая строка рисунка), первый пик радиальной функции распределения немного сдвигается в область малых расстояний и становится более узким. Это связано с тем, что в системе образуется все больше и больше пар “голова-хвост”. Однако с ростом параметра анизотропии (см. Рис. 3) этот эффект исчезает, что говорит о том, что ориентация магнитных моментов “голова-хвост” заменяется их антипараллельной ориентацией (для больших значений магнитного момента) или система становится все менее и менее коррелированной. С увеличением числовой концентрации (вторая строка на Рис. 3), данная закономерность не меняется, а лишь становится более выраженной. Кроме этого, для большого параметра анизотропии (точка на Рис. 3) высота первого пика RDF намного ниже, чем для практически изотропных частиц (квадраты на Рис. 3). Это означает, что процесс формирования пар вытянутых частиц идет очень слабо. Для количественного анализа описанных процессов был теоретически проведен кластерный анализ.

Прежде всего были изучены снэпшоты, полученные в компьютерных экспериментах (см. Рис. 4).

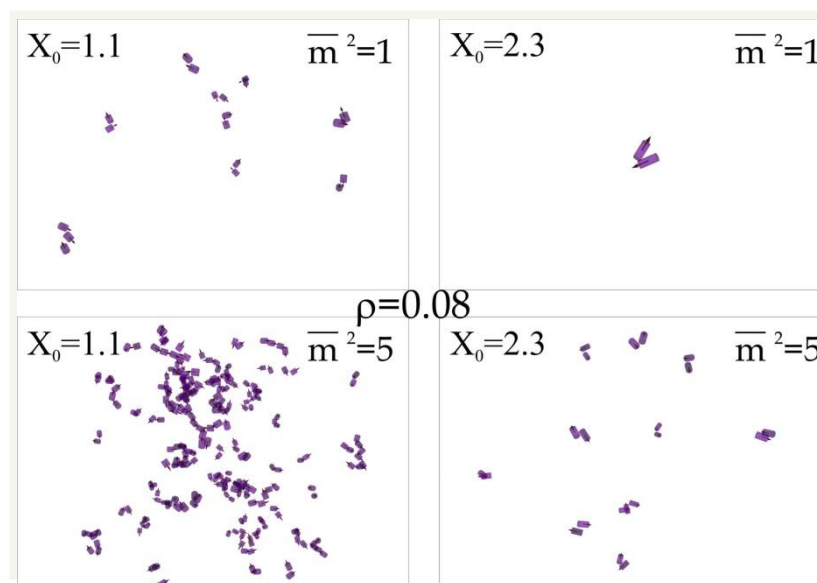


Рис. 4 Снэпшоты

Здесь представлены только те частицы, которые находятся в кластерах. Две частицы считаются принадлежащими одному кластеру, если расстояние между ними меньше, чем 1.3, а дипольная энергия отрицательна. В левой колонке легко увидеть много цепочек с положением магнитных моментов “голова-хвост”. Это соответствует тому, что RDF имеет



высокий и узкий пик для слегка анизотропных частиц. В отличие от левой системы, на правой стороне есть только конфигурации “бок-о-бок” с антипараллельной ориентации магнитных моментов. Все это соответствует тому, что начальная часть RDF для системы сильно и слабо анизотропных частиц имеет различное поведение.

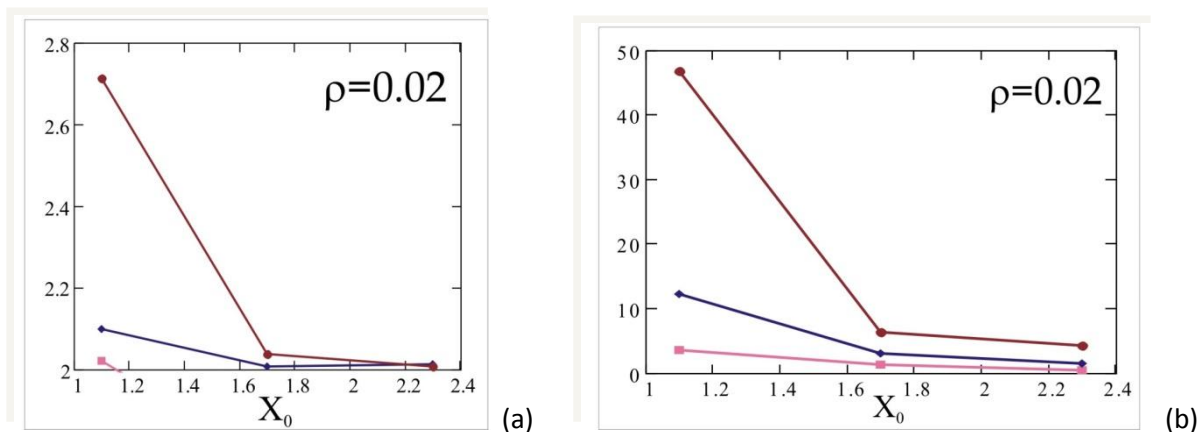


Рис. 5 Кластерный анализ. (a) средний размер кластера, (b) степень заагрегированности.

На Рис. 5 приведены некоторые количественные параметры микроструктуры в зависимости от анизотропии формы для различных магнитных моментов. На рис. 5а представлен средний размер кластера. Видно, что для малых значений анизотропии формы (самые левые точки) магнитное взаимодействие существенно влияет на средний размер кластера. Но с увеличением значения анизотропии это влияние исчезает. А для  $X_0$  равного 2.3 в системе формируются только димеры. Такое же поведение имеет и степень заагрегированности (Рис. 5б). Для  $X_0$  равного 1.1 в системе много различных кластеров (до восьмидесяти процентов при квадрате магнитного момента равно 5) в отличие от случая высокой анизотропии формы (самые правые точки) (здесь менее двадцати процентов общего числа частиц находятся в кластерах). Можно сказать, что анизотропия формы предотвращает формирование кластеров. Возникает следующий вопрос: насколько важно магнитное взаимодействие?

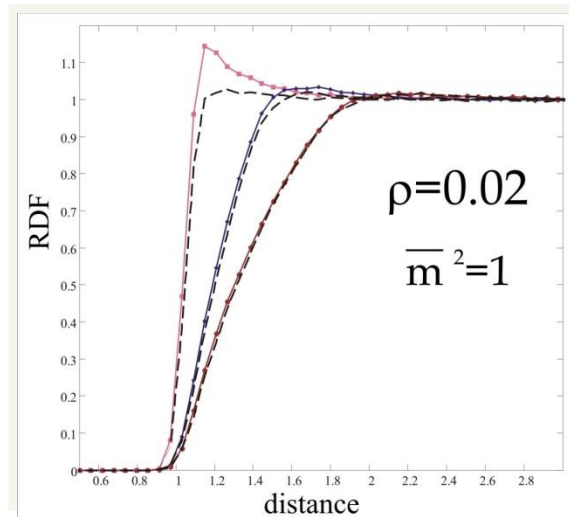


Рис. 6 Радиальная функция распределения.

Чтобы ответить на этот вопрос, на Рис.6 представлена реальная RDF (сплошные линии) и RDF для немагнитной Гей-Берне системы (пунктирные линии). Видно, что они имеют различное поведение для различных анизотропий формы. Для слегка несферических частиц (квадраты) виден большой разрыв между двумя кривыми, но для удлинённых частиц (точки) эта разница исчезает. Это означает, что анизотропное стерическое взаимодействие может экранировать магнитное. Далее будет проанализировано влияние анизотропии формы на макросвойства системы.

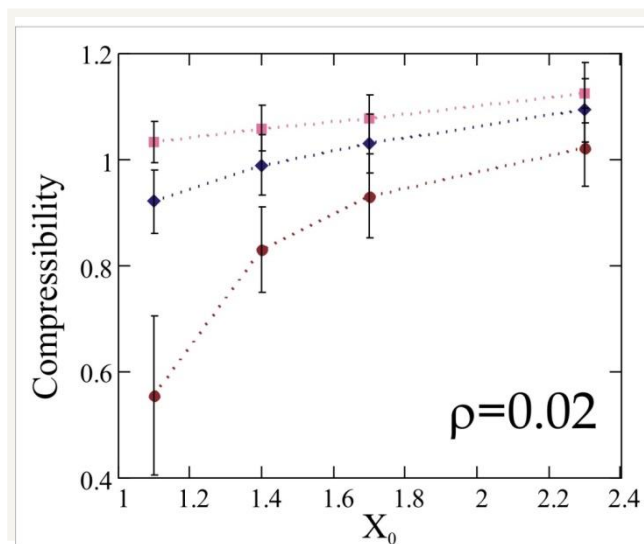


Рис. 7 Сжимаемость.

На Рис. 7 представлен коэффициент сжимаемости в зависимости от анизотропии формы для плотности равной 0.02. Различные символы соответствуют различным значениям магнитных моментов. С ростом  $X_0$  (параметра анизотропии) сжимаемость увеличивается для всех магнитных моментов. Далее поговорим о магнитных свойствах системы.

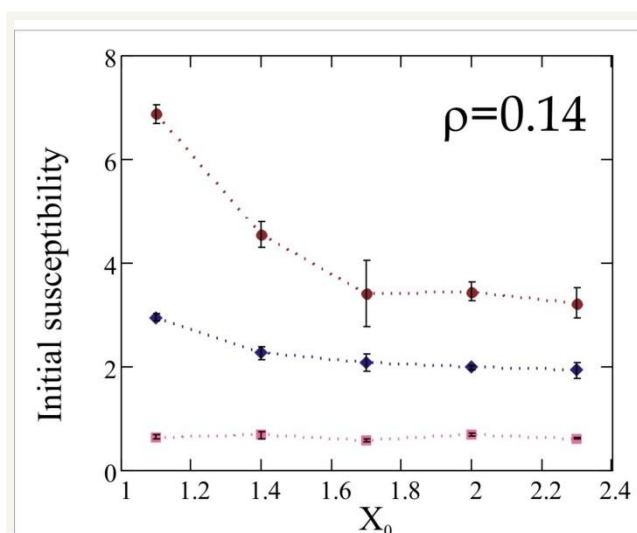


Рис. 8 Начальная восприимчивость.

На Рис. 8 приведена начальная магнитная восприимчивость. Различные символы соответствуют различным значениям магнитных моментов (наименьшее значение имеют квадраты, наибольшее – точки). Начальная восприимчивость изотропных частиц, как известно, быстро растет с ростом дипольного момента в связи с коллективным взаимодействием дипольных моментов. Аналогичное поведение видно для системы слабо анизотропных частиц ( $X_0$  равно 1.1) (первые точки на графике). Однако как только анизотропия начинает расти, не только абсолютное значение восприимчивости уменьшается, а также относительное изменение становится меньше.

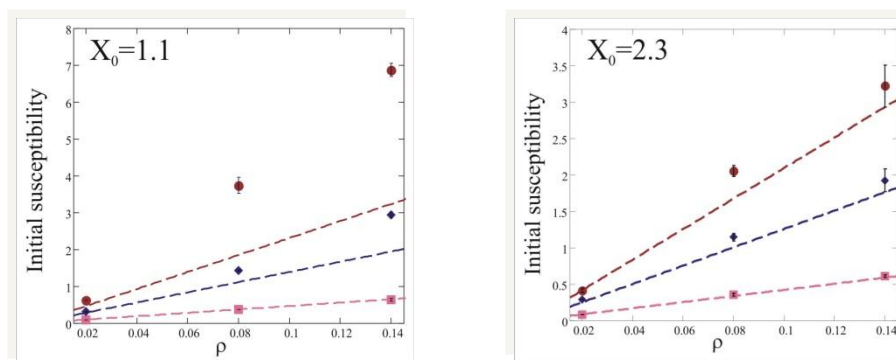


Рис. 9 Начальная восприимчивость: Теория Ланжевена.

С теоретической точки зрения, первым шагом является теория Ланжевена, и ее результат представлен на Рис. 9 для двух значений  $X_0$  (левая картинка для 1.1 и правая для 2.3). В обоих случаях теория работает только для наименьшего значения магнитного момента (см. розовые линии и квадраты). Также видно, что для более высокого значения

анизотропии теоретические предсказания гораздо ближе к результатам компьютерных экспериментов, чем для  $X_0=1.1$ . Какую же теорию можно использовать для анизотропных магнитных частиц?

Известно, что для разбавленных систем дипольных твердых сфер, для описания магнитных свойств хорошо себя зарекомендовали две теории. Для сильных магнитных взаимодействий используется цепочечная модель [6-7], а при умеренных значениях магнитного момента полезно использовать модифицированную теорию среднего поля первого и второго порядка.

Было решено использовать эти теории для анизотропных частиц с некоторыми необходимыми модификациями.

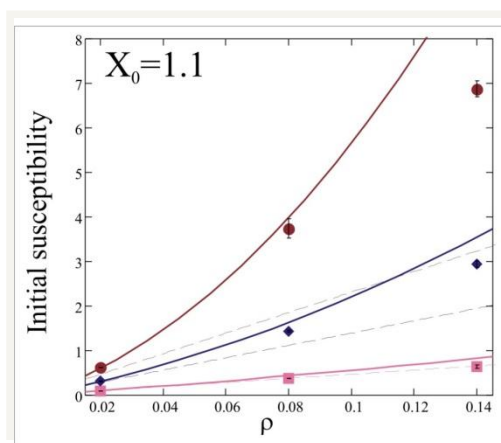


Рис. 10 Начальная восприимчивость: цепочечная модель.

На Рис. 10 представлены результаты компьютерных экспериментов (символы) и теоретические предсказания (сплошные линии – цепочечная модель, пунктирные линии – теория Ланжевена) для  $X_0=1.1$ . Видно хорошее согласие данных и можно сказать, что формирование цепочек является причиной высокого значения начальной восприимчивости. Для  $X_0=2.3$  в настоящий момент ведется работа по модификации теории среднего поля. Но на основе анализа начальной восприимчивости в этом случае можно сделать два основных вывода:

(первый) при комнатной температуре энтропия пары антипараллельных частиц очень низкая, и, таким образом, не так много стабильных пар образуется даже при большом значении магнитного момента;

(второй) полный дипольный момент антипараллельной пары в среднем равен нулю, и восприимчивость такого объекта значительно ниже, чем у димера с ориентацией

магнитных моментов “голова-хвост”. Другими словами, анизотропии формы частиц может существенно изменить микроструктуру системы таких частиц при комнатной температуре.

В итоге, в ходе работы по НИР были проведены компьютерные эксперименты при комнатных температурах и разработаны некоторые теоретические подходы. Было показано, что микроструктура системы изменится от цепочек (образующихся в системе слегка анизотропных частиц) до практически пространственно-однородной системы (для вытянутых частиц). Используя анизотропию формы как контролирующий параметр можно изменять микроструктуру системы, не меняя ее намагниченности насыщения. Это очень важно в различных технических и медицинских приложениях. Однако исследование еще не закрыто. Например, необходимы дополнительные длительные компьютерные эксперименты для уменьшения ошибки эксперимента в начальной восприимчивости, а также теория для описания сжимаемости таких систем.

### **Магнитные нанокубики**

В последнее время появилось достаточно много работ, в которых рассматриваются магнитные нанокубики. Кроме особенности формы и сложного стерического взаимодействия, данные частицы могут обладать и различным положением магнитного момента внутри частицы. Он может проходить через центр, параллельно стороне, а также быть направлен по диагонали куба. Все это сильно затрудняет процесс теоретического поиска основного состояния системы таких частиц, даже для небольшого их числа. Поэтому было принято решение о проведении компьютерных экспериментов для выявления возможных структур основного состояния, с целью их дальнейшего теоретического анализа. Для этого был использован метод виртуальных частиц, когда куб строится из сферических частиц (см. Рис. 1b), одна из которых обладает магнитным моментом. Для работы с такими составными частицами был применен специальный алгоритм и первые результаты представлены на Рис. 11.

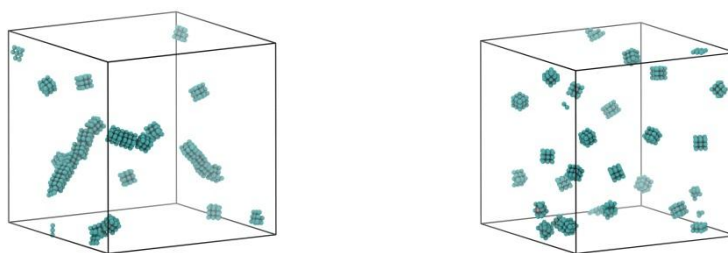


Рис. 11 Снепшоты для разных положений магнитного момента внутри куба.

На данных снепшотах видны различные агрегаты в зависимости от положения магнитного момента, например, цепочки и некоторые конгломераты. Данные микроструктуры являются претендентами на основное состояние системы. В настоящий момент проводится тщательный кластерный анализ полученных структур и начат процесс их теоретического описания.

## 2 Исследование системы немагнитных анизотропных частиц (короткие дуплексы ДНК)

В данной части исследования была построена радиальная функция распределения системы коротких дуплексов ДНК для различных соотношений полуосей, в нематической фазе. Данные частицы моделируются также цилиндрами. Поэтому для моделирования стерического взаимодействия используется потенциал Гей-Берне [5].

Так как в нематической фазе в системе есть выделенное направление (нематическая ось), то рассматриваются два случая: параллельно и перпендикулярно ей. Данные из компьютерных экспериментов приведены на Рис. 12.

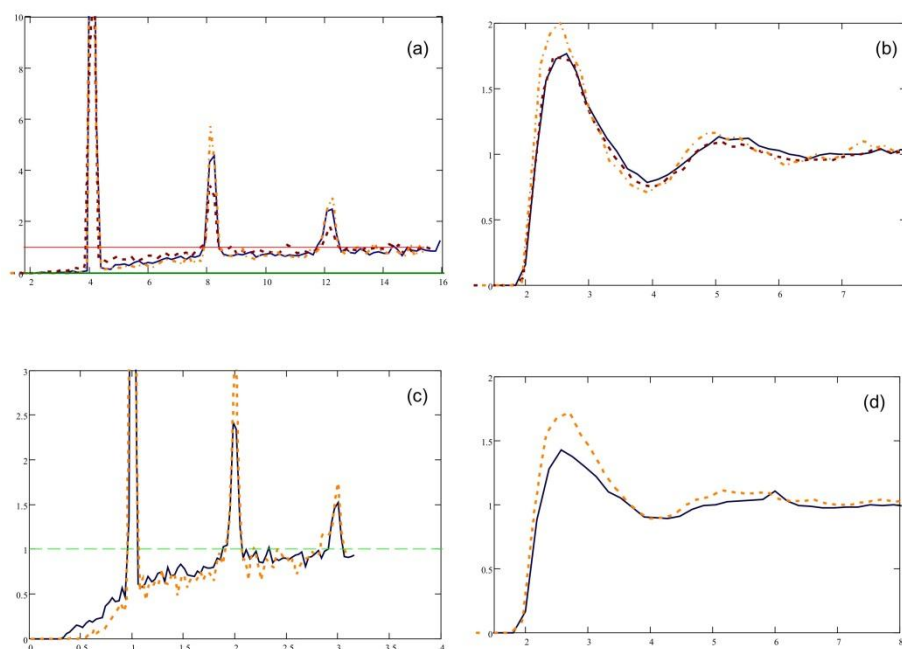


Рис. 12 RDF.

Рис.12a и12b соответствуют соотношению полуосей  $X_0=2$ , а Рис. 12c и12d  $X_0=3$ . Разные типы линий соответствуют разным концентрациям. Слева представлена RDF для параллельного случая, а справа – для перпендикулярного. Видно, что слева поведение подобно изотропной системе, поэтому было принято решение о том, чтобы использовать уже имеющуюся теоретическую модель. В ней использованы два подхода: цепочечный и диаграммный метод для одиночных дуплексов[8]. Сначала две эти методики были применены по-отдельности. На Рис. 13 приведена часть, связанная с цепочками. Видно, что линия (цепочечная модель), хорошо описывает пики RDF, но плохо описывает часть между ними.

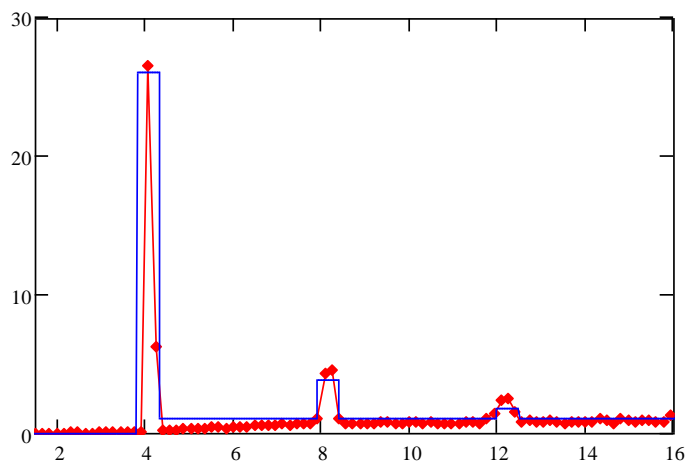


Рис. 13 RDF в параллельном случае: цепочечная теория и компьютерный эксперимент

Анализ начального участка RDF показал, что ее поведение похоже на поведение разбавленной системы, но очень вытянутых цилиндров ( $X_0 > 10$ ). Для таких систем автором НИР уже был разработан метод по вычислению RDF[8]. Ее результат приведен на Рис. 14 (теоретическая модель изображена пунктиром.).

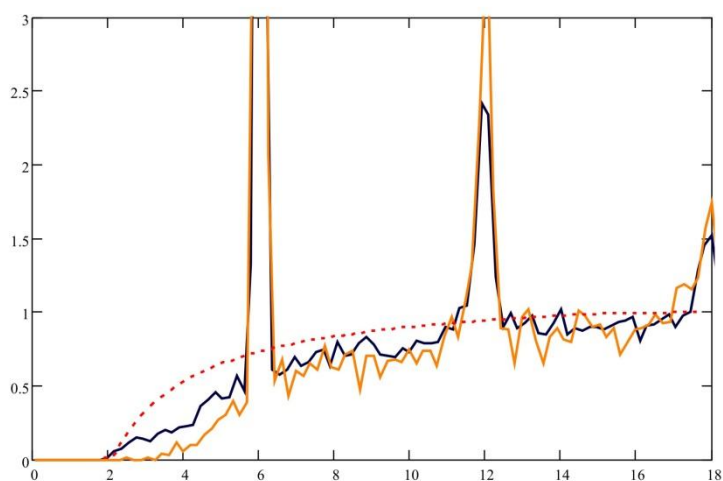


Рис. 14 RDF в параллельном случае: метод [8] и компьютерный эксперимент

Видно, что качественное поведение компьютерных экспериментов описано верно, а вот количественного совпадения пока добиться не удалось.

В случае перпендикулярно нематической оси система подобна дискам, поэтому для описания RDF коротких дуплексов ДНК использовалась RDF для твердых дисков [9]. Результат этого приведен на Рис. 15.



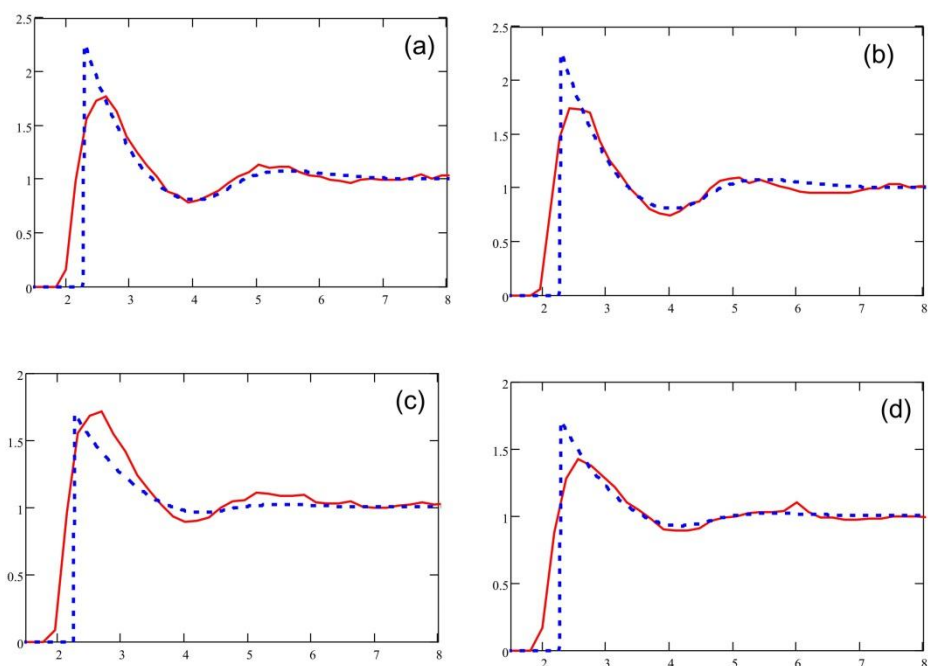


Рис. 15 RDF в параллельном случае: метод [8] и компьютерный эксперимент

Здесь приведены результаты для двух значений параметра анизотропии (он равен двум для верхней строки и трем для нижней) и разных концентраций. Пунктирная линия – теория, сплошная – результат компьютерного эксперимента. Видно, что RDF для твердых дисков качественно хорошо описывает поведение системы, однако, также наблюдаются количественные расхождения. Над решением данных проблем в настоящий момент ведется активная работа. После этого, можно будет переходить к построению структурного фактора, а также к теоретическому анализу других термодинамических характеристик.

Также был проведен первоначальный анализ различных фаз (изотропной и анизотропной) системы. Оказывается, что с ростом анизотропии формы переход от изотропной фазы в нематическую происходит при меньшей концентрации. Это связано с тем, что частицы уже обладают выделенным направлением. Также, переходу в нематическую фазу способствует увеличение энергии взаимодействия дуплексов (так как это способствует образованию цепочек).

В итоге, для системы коротких дуплексов ДНК в нематической фазе были получены выражения для вычисления радиальной функции распределения. Было показано, что анизотропия формы, а также энергия взаимодействия дуплексов может способствовать или препятствовать образованию нематической фазы.

## **Заключение**

### **1. В процессе выполнения проекта были получены следующие результаты:**

#### Магнитные частицы:

- проанализированы макроскопические характеристики системы, найдены зависимости от формы частиц, величины магнитного момента и концентрации, проведен кластерный анализ;
- поставлены и проведены компьютерные эксперименты для расчета начальной магнитной восприимчивости, сжимаемости и осуществления кластерного анализа;
- получены первые результаты по возможным структурам основного состояния системы из небольшого числа нанокубов.

#### Короткие дуплексы ДНК:

- построены радиальные функции распределения для нематической фазы, изучено их поведение;
- проведено сравнение полученных теоретических данных с данными компьютерных экспериментов, разработан план по проведению уточняющих экспериментов и построения более точных теоретических моделей;
- проведен первичный анализ фазовой диаграммы.

### **2. Результаты исследований доклаживались на международных конференциях**

- Biocompatible ferrocolloids: stabilization, properties control and application, Кошице, Словакия, 26 – 28 августа 2013 г. (соавторство доклада).
- International Soft Matter Conference, Рим, Италия, 15 – 19 сентября 2013 г. (устный доклад на английском языке и постерный доклад)
- 13th German Ferrofluid Workshop, Бенедиктбоерн, Германия, 26 – 27 сентября 2013 г. (постерный доклад).

### **3. По итогам исследований опубликовано 4 тезиса докладов, 1 статья, 2 статьи готовятся к печати.**

Список публикаций представлен в Приложении 1 настоящего отчета.

**4. Область применения:** Результаты НИР будут использоваться в образовательном процессе при чтении специальных курсов для студентов и аспирантов Уральского федерального университета, для научных тематик курсовых, бакалаврских и магистерских

квалификационных работ, выполняемых на кафедре математической физики ИМКН. Накопленный опыт в области постановки и проведения компьютерных экспериментов позволит обучить собственных специалистов в данной области. В научном плане результаты данного проекта будут использованы для более глубокого понимания микроструктуры систем самоорганизующихся частиц различной формы, ее влияния на макроскопические свойства таких систем. Это даст возможность выработать рекомендации для синтеза принципиально новых материалов, содержащих самоорганизующиеся частицы различной формы. Это будет важно в различных областях применения таких материалов (технике, медицине и т.д.), а также при дальнейшем теоретическом изучении их различных макросвойств. Кроме того, проведенное исследование расширит область научных знаний автора проекта и позволит начать работу над развернутым планом для докторской диссертации.

## Литература

- [1] Sacanna S. et al, “Fluorescent monodisperse silica ellipsoids for optical rotational diffusion studies”, *Langmuir* 22 (2006) 1822-1827.
- [2] Günter A. et al, “Rotational diffusion of magnetic nickel nanorods in colloidal dispersions”, *Journal of Physics: Condensed Matter* 23 (2011) 325103 (14pp).
- [3] Nakata M. et al, “End-to-end stacking and liquid crystal condensation of 6 to 20 base pair DNA duplexes”, *Science* 318 (2007) 1276-1279.
- [4] Zanchetta G. et al “Right-handed double-helix ultrashort DNA yields chiral nematic phases with both right- and left-handed director twist”, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 107 (2010) 17497-17502.
- [5] Gay J. G. and Berne B. J. “Modification of the overlap potential to mimic a linear site-site potential”, *J. Chem. Phys.* 74 (1981) 3316-3319.
- [6] Ivanov A.O., Klokkenburg M., Erne B., Mendelev V. “Magnetization behavior of ferrofluids with cryogenically imaged dipolar chains”, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2008, V. 20, N 20, P. 204113-01-05.
- [7] Ivanov A.O., Kantorovich S.S., Mendelev V.S., “Pyanzina E.S. Ferrofluid aggregation in chains under the influence of a magnetic field”, *J. Magnetism and Magnetic Materials*, 2006, V. 300, N 1, P. e206-e209.
- [8] S. Kantorovich, E. Pyanzina, C. De Michele, F. Sciortino “How to calculate structure factors of self-assembling anisotropic particles?”, *Soft Matter* Volume: 9 Issue: 17 Pages: 4412-4427
- [9] S. Bravo Yuste and A. Santos “A heuristic radial distribution function for hard disks”, *J. Chem. Phys.* 99 (3), p. 2020-2023.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1

### Список публикаций

по итогам выполнения исследований по проекту

«Микроструктура и термодинамические свойства систем частиц различной формы»

### Тезисы докладов

1. *How can computer simulations and theory help in understanding dipolar soft matter?* E. Pyanzina, E. Novak, E. Minina, S. Kantorovich, M. Sega, A. Ivanov // Book of abstracts of Biocompatible ferrocolloids: stabilization, properties control and application, Кошице, Словакия, 2013.
2. *Systems of particles with shape anisotropy: microstructure and macroproperties* E. Pyanzina, J. Donaldson, S. Kantorovich // Book of abstracts of International Soft Matter Conference, Рим, Италия, 2013, p. 83.
3. *Self-assembling DNA duplexes: calculating structure factors* S. Kantorovich, E. Pyanzina, C. De Michele and F. Sciortino // Book of abstracts of International Soft Matter Conference, Рим, Италия, 2013, Stand 153, SELF-1739, p. 731
4. *Influence of shape and internal particles anisotropy on the macro-properties and structure of magnetic fluids* E. Pyanzina, J. Donaldson, S. Kantorovich // Book of abstracts of 13th German Ferrofluid Workshop, Бенедиктбоерн, Германия, 2013, pp. 77-78.

### Статьи

1. S. Kantorovich, E. Pyanzina, F. Sciortino *The influence of shape anisotropy on the microstructure of magnetic dipolar particles* // Soft Matter Volume: 9 Issue: 29 Pages: 6594-6603 DOI: 10.1039/c3sm50197c